Física Teórica 3
Serie 11: Modelo de Ising y Fenómenos críticos

2^{do} Cuatrimestre de 2012

Para estudiar el modelo de Ising, resolveremos exactamente en el problema 1 el caso unidimensional y con simulación computacional el caso bidimensional.

Problema 1: En una dimensión el modelo de *Ising* puede ser resuelto en forma exacta.

a) Considere a los N spines colocados en un círculo con condiciones periódicas de contorno (es decir $s_1 = s_{N+1}$). Muestre que la función de partición canónica Q_N es

$$Q_N(b, K) = \sum_{s_1,\ldots,s_N=\pm 1} \exp\left(\sum_{i=1}^{N}(bs_i + Ks_is_{i+1})\right),$$

donde $b = \beta\mu B$ y $K = \beta J$.

b) Muestre que $Q_N = \text{Traza}(q^N)$ donde q es la matriz 2×2 de elementos

$$\exp\left[b(s+s')/2 + Kss'\right] \ (s, s' = \pm 1)$$

Ayuda: El sumando del argumento de la exponencial en Q_N puede ser reescrito en la forma $b(s_i + s_{i+1})/2 + Ks_is_{i+1}$.

c) Muestre que la función de partición puede escribirse en la forma

$$Q_N = \lambda_+^N + \lambda_-^N ,$$

siendo

$$\lambda_\pm = e^K \left\{\cosh b \pm (\sinh^2 b + e^{-4K})^{1/2}\right\}$$

los autovalores de la matriz q.

d) Muestre que en el límite termodinámico, $\lim_{N\to\infty} \frac{\ln Q_N}{N} = \ln \lambda_+$

e) Calcule la magnetización media $M = M(T, B)$ y muestre que no hay magnetización espontánea cuando $B \to 0^+$.
Ayuda: la magnetización media de cada spin es

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{N}\frac{\partial \ln(Q_N)}{\partial b}|_K$$

Modelo de Ising: Práctica Computacional

Se formarán grupos de 2 o 3 personas que trabajarán en equipo para implementar el programa de simulación y calcular las cantidades físicas relevantes.

Cada grupo elaborará un informe en el cuál se presentarán los gráficos de las cantidades obtenidas y se analizarán los resultados. No es necesaria una larga introducción sobre el modelo de Ising, prefiriéndose más énfasis en la discusión física de los resultados numéricos obtenidos. Puede explicarse lo que se considere necesario del modelo de Ising, para el análisis de los datos obtenidos.

Se propone escribir el código para una simulacion Monte Carlo del Modelo de Ising en 2D con las siguientes características:

- Se implementará el algoritmo de Metrópolis para una red cuadrada de spines. Se obtendrá una colección representativa de distintos estados del ensemble canónico, como se explicará en las clases prácticas.

- Condiciones de contorno periódicas. Esto quiere decir, que asumimos que la última columna de spines interactúa con la primera y viceversa. De la misma forma, la última fila de espines interactúa con la primera y viceversa.
  Estas condiciones se utilizan para suprimir los efectos de borde. Se busca estudiar la magnetización como si estuviera en el seno de un material magnético (*bulk*), sin considerar los efectos particulares de las superficies o bordes del sistema. Esta es una forma numérica usual de considerar un sistema infinito.

- Considerar una red cuadrada de 20×20 spines. El Hamiltoniano de Ising del sistema es de la forma:
$$H = -J \sum_{i=1}^{N} \sum_{,j=\langle i \rangle_{1v}} s_i s_j,$$
  donde $\langle i \rangle_{1v}$ nota los 4 primeros vecinos de cada spin i. Conviene definir el estado del sistema en una matriz cuadrada donde los estados de spin estén dados por los valores -1 o 1, según esté up o down.

- Tome como configuración inicial del sistema una asignación aleatoria de 1 o -1 para cada spin.

- Luego de verificar que el programa funcione calcule los valores medios de las magnitudes físicas de interés. Tomamos para los cálculos $k_B \equiv 1$.

a) Presentar gráficos de las siguientes cantidades como función de la temperatura:

   I) Magnetización media $\langle M(T, B = 0) \rangle$
   II) Energía media $\langle E \rangle$

b) Presentar histogramas de $\langle E \rangle$ y $\langle M \rangle$ para las configuraciones obtenidas con la simulación de Monte Carlo para distintas temperaturas.

c) Analizar el comportamiento de sus fluctuaciones. Relacione la varianza de éstas cantidades ($\langle \delta E^2 \rangle \equiv (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$ y $\langle \delta M^2 \rangle$) con magnitudes físicas de interés. Cálcule, por ejemplo el calor específico por partícula: $c_V = \frac{\beta^2}{N}(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$. También puede calcularse la susceptibilidad a campo nulo $\chi(H \to 0)$.

d) Discutir brevemente los efectos de tamaño finito, debidos a que las muestras usadas en la simulación tienen un número de espines pequeño en comparación con el límite termodinámico.

e) A partir de la curva M vs. T estime la temperatura crítica T_c. Explique qué observa con los valores medios de M a medida que se acerca al punto crítico. Tome como referencia que la temperatura crítica del cálculo exacto es $T_c = 2{,}269$.

f) Con el valor de T_c, encuentre el exponente crítico β tal que $M \sim (T - T_c)^{\beta}$. Compare con el resultado de la aproximación de Bragg-Williams.

Sugerencias:

- Implementar primero el algoritmo de Monte Carlo y luego de confirmar que está funcionando, agregue las cantidades a medir. Es decir, use la técnica "dividir y conquistar", de resolver completamente porciones del problema, antes de pasar a otra parte.
- La configuración inicial, al ser aleatoria, pone al sistema en un punto del espacio de fases, que seguramente no será de equilibrio respecto de las condiciones físicas. Realice una primera corrida, de la cuál no utilizará datos, para "termalizar" al sistema. Es decir, llegar al equilibrio compatible con las condiciones físicas impuestas. Luego realice otra simulación, desde donde termina la anterior, en la que sí se medirán las magnitudes de interés.
- La llegada al equilibrio puede verificarse observando que la energía, por ejemplo, fluctúa respecto de un dado valor en lugar de tener derivas al observar un gráfico de energía vs. paso de Monte Carlo.